

13 その他の最適化法

組み合わせ最適化の問題において、これまで述べてきた手法が適用できないものが数多く存在する。また、大域的な最適解ではなく、近似解でも実用上、十分なことも多い。本講義ではこうした近似解を得るための代表的な手法について述べる。

13.1 近似アルゴリズム

離散的な最適化問題において、厳密な最適解を求めることが困難であっても、工夫をすることで、最適解に対して実用的な誤差範囲で近似最適解を得ることができる場合がある。ここでは、以下に示す 0-1 ナップザック問題を例に使う。

【0-1 ナップザック問題】

今、 N 個の品物があり、それぞれ価格と重量が p_i, w_i ($i = 1, \dots, N$) で与えられている。最大の運搬重量 W のナップザックに最大の価格の品物を詰めるにはどうしたらよいか？

Item No.	1	2	3	4	5	
Price	5	7	3	4	2	最大重量 $W = 7$
Weight	4	6	2	5	1	

これは、0 または 1 をとる N 個の変数 x_i を用いて以下のように定式化できる。

$$\text{目的関数: } \sum_{i=1}^N p_i x_i \text{ 最大化}$$

$$\text{制約条件: } \sum_{i=1}^N w_i x_i \leq W$$

この問題の解空間は 2^N であり、品物の数が増えてくると解候補が指数関数的に増加する組み合わせの爆発が生じて全数探索が難しくなる。

ここで挙げたような離散最適化問題に対する、近似最適解を得るための手法（アルゴリズム）として、以下の 6 つのアプローチが良く用いられる。

1. 欲張り法 (greedy method) : 目的関数への貢献度を示す局所的な評価に基づいて可能解を順次、直接構成していく方法で、通常、試行錯誤を含まない。0-1 ナップザック問題の例題では、重量あたりの価格の高い品物から順次、ナップザックに入れていくことに該当する。
2. けちけち法 (stingy method) : 欲張り法とは反対に、目的関数への貢献度を示す局所的な評価で小さいものから順次、除外していくことで直接に構成していく方法。例題では、はじめにすべての品物を選択して、重量あたりの価格の低い品物から順次、ナップザックから取り出していく、制約条件を満足させることに該当する。一般に欲張り法とけちけち法の出力する解は一致しない。
3. ランダム法 (random method) : 解空間から解を複数個、ランダムに選択し、その中でもっともよい目的関数の値をもつものを近似最適解とするもの。モンテカルロ法 (Monte Carlo method) と呼ばれる。例題では品物 i を選択するかしらないかを乱数で選択して解を生成し、重量の制約を満足しているかどうかをテストすることに該当する。
4. 近傍探索法 (neighborhood search) : なんらかの方法で得られた可能解 (妥当解) x の近傍 $N(x)$ の中で、目的関数の値を改善できるものがあれば、それに置き換える方法。例題では、選択した品物の中の一つと、未選択のものとを交換してみても目的関数 (合計した価格) がよくなるかどうかを調べてみることに該当する。

5. 緩和法 (relaxation method) : 制約条件を緩和することで一つの解を簡単に構成し, それに修正を加えて可能解を得る方法. 例題では, 前述のけちけち法のやり方がそのまま緩和法に該当する.
6. 分割法 (partitioning method) : 対象問題の定義領域いくつかの部分領域に分割し, それぞれの解を合成してもとの問題の可能解を作る方法. 例題では, たとえば, ナップザックを $W_1 = 3$ と $W_2 = 4$, 品物を軽・重の 2 グループに分割してそれぞれでの最大化をはかるアプローチに相当する.
7. 部分列挙法 (partial enumeration method) : すべてを列挙することが困難である場合, その一部分のみを組織的に列挙し, その結果に基づいて, 近似最適解を構成する方法. 例題では, 5 個の品物から例えば 2 個を選ぶすべての組み合わせをつくり, 制約条件を満足している場合に, それ以外の品物の選択を他の近似解法で求めて, その結果得られた最良値を出力するようにする.

【練習問題 13-1】

上であげた 0-1 ナップザック問題を欲張り法とけちけち法でそれぞれ解を構成してみよ.

13.2 メタヒューリスティック

上で述べた近似アルゴリズムを反復したり組み合わせることで, より効果の高い近似アルゴリズムを構成するための方法をメタヒューリスティック (meta heuristic) とよぶ. ここでは代表的なメタヒューリスティックを列挙する.

1. 局所探索法 (local search) : 反復改善法 (iterative improvement method) とも呼ばれる. 近傍探索を改善が得られなくなるまで反復して行うもの. 良い初期解から出発するとよい局所最適解が得られる傾向がある.
2. ランダム多スタート局所探索法 (random multi-start local search) : ランダム法と局所探索法とを組み合わせたもので, ランダムに発生させた多数の初期解それぞれに対して局所探索法を行い, その中で最良のものを近似最適解とするもの.
3. アニーリング法 (simulated annealing method) : 模擬アニーリング法, シミュレーテッド・アニーリング法とも呼ばれる. 最小化問題の局所探索において, 現在の解 x に対して任意の近傍解 y を選び, $\delta = f(y) - f(x)$ としたときに, $\delta > 0$ であっても, $e^{-\delta/T}$ の確率で y を選択するという挙動を示す. T が小さくなると選択される確率が 0 に近づく. この温度 T を反復の繰り返しに従って小さな値 (低温) にしていく.
4. タブー探索法 (tabu search) : 局所探索において, 近傍 $N(x)$ において x 以外の最良の解 y を次の解候補とするが, その際に, 前の解 x をタブーリスト (tabu list) とよばれるリストに登録して再探索しないようにする. これによって, 解探索の巡回を防止でき, 効率的な解探索が可能となる. 適応型記憶計画 (adaptive memory programming) とも呼ばれる.
5. 遺伝アルゴリズム (genetic algorithm) : 遺伝子の進化からアイデアを取り入れた確率的なアルゴリズム. 解の交叉 (crossover), 突然変異 (mutation), 改良, 淘汰などの操作を適用する.

こうしたさまざまな方法が提案されているが, 対象とする問題の性質をよく検討し, それに適合した手法を選択して, 手法に固有の各種パラメータの設定を適切に行うことが, 最適化問題のよい近似最適解を得る上では不可欠である. すなわち, 万能の最適化手法は現在のところ存在せず, 問題の分析と各手法の適用範囲と注意事項をよく理解していることが利用者に求められている.

【参考文献】

- 茨木俊秀著 : 「離散最適化法とアルゴリズム」, 岩波講座応用数学「方法 8」, 岩波書店
- 今野浩著 : 「数理決定法入門 / キャンパスの OR」, 朝倉書店